

В настоящее время собран макет системы, включающий в себя прототип датчика и программное обеспечение верхнего уровня, реализующее базовый функционал. В ходе тестирования работы прототипа системы было определено, что при использовании данного метода достигается необходимая точность измерения количества движения. Следующим шагом необходимо отладить функционирование программного обеспечения верхнего уровня при подключении порядка нескольких десятков датчиков. В дальнейшем планируется провести тестирование системы с целью оценить возможность детектирования посещений кормушки и поилки лабораторной мышью, а также возможность детектирования выделений мыши.

Список литературы:

[1] AMG88xx Grid-EYE Datasheet.

Разработка универсальной программы, позволяющей изучать строение молекул и оценивать центры специфической сольватации

Халявка Мария Анатольевна

Кубанский государственный университет

Жаркова Оксана Михайловна

mari.khalyavka@mail.ru

В настоящее время происходят коренные изменения в сфере высоких технологий – информационных технологиях, микромеханике и др., связанные с фундаментальными и прикладными исследованиями, конструированием и практическим использованием материалов и устройств, элементы которых имеют размеры менее 100 нанометров.

Чтобы создать любой нанообъект необходимо детальное знание его структуры. А знание структуры, в свою очередь, в виду малости объектов, возможно с помощью методов компьютерного моделирования. Под знанием структуры понимается геометрическая конфигурация, соответствующая глобальному минимуму энергии. Кроме того, необходимо учесть динамическое поведение молекулы и влияние межмолекулярных взаимодействий. В настоящее время существуют программные продукты, позволяющие произвести подобные вычисления в рамках неэмпирических и полумэмпирических методов, однако, нет программы, которая бы единым образом объединяла расчет структуры молекулы и влияние межмолекулярных взаимодействий.

В связи с этим, целью данной работы является создание программы, которая позволила бы единым образом:

- оптимизировать структуру молекулы;
- исследовать динамическое поведение объекта;
- произвести учет неспецифической сольватации;
- оценить центры специфической сольватации.

Для решения задачи об оптимизации геометрической структуры молекул используется метод молекулярной механики [1], для учета центров специфической сольватации будет использован метод молекулярного электростатического потенциала [2].

В методе молекулярной механики атомы рассматриваются как ньютоновские частицы, которые взаимодействуют друг с другом посредством неких потенциальных полей, задаваемых эмпирически. Потенциальная энергия взаимодействия зависит от длины связей, углов связи, торсионных углов и нековалентных взаимодействий (в т.ч. сил Ван-дер-Ваальса, электростатических взаимодействий и водородных связей). В этих расчетах силы, действующие на атомы, представляются в виде функций координат атомов.

Метод МД основан на численном решении классических уравнений движения частиц в некотором выделенном объеме среды. Все частицы, находящиеся в выделенном объеме (МД ячейке), взаимодействуют друг с другом посредством заданного потенциала взаимодействия.

Информативным является метод молекулярного электростатического потенциала (МЭСП). Его физический смысл следующий. Пусть заряд q_1 создает в точке пространства с радиус-вектором \mathbf{r} МЭСП $V(\mathbf{r})$. Если в эту точку поместить точечный заряд q , то энергия электростатического взаимодействия между зарядом q и зарядом q_1 будет равна qV (в одноэлектронном приближении без учета поляризационной составляющей). В каждой точке \mathbf{r} пространства внутри и вне молекулы МЭСП имеет вид:

$$V(r) = - \int \frac{\rho(r')}{|r-r'|} dV' + \sum_{\alpha} \frac{Z_{\alpha} |e|}{|r-R_{\alpha}|} \quad (1)$$

где $\rho(r)$ – электронная плотность, Z_{α} и R_{α} – заряд и радиус-вектор ядра α .

В качестве языка программирования используется Фортран. Использование Фортрана, как основного алгоритмического языка, в первую очередь мотивировано самой сутью технологии или метода МД моделирования. В компьютерной реализации МД обычно приходится иметь дело с огромным набором схожих фрагментов или циклов, которые выполняются многократно одинаково.

Программа рассчитана на исследование молекул, содержащих атомы углерода, кислорода, водорода и азота. Максимальное число атомов – 100.

В настоящее время программа находится в начальной стадии разработки. Реализуется метод молекулярной механики. Проводится работа по тестированию программы.

Список публикаций:

[1] Соловьев М. Е., Соловьев М. М. Компьютерная химия – М.: Солон-Пресс, 2005. – 536 с.

[2] Майер Г. В., Артюхов В. Я., Базыль О. К и др. Электронно-возбуждённые состояния и фотохимия органических соединений. - Новосибирск: Наука, 1997. – 232 с..

Численные методы для поиска управления квантовыми системами

Шауро Виталий Павлович

Институт физики им. Л.В. Киренского СО РАН

Shaurkin@hotmail.com

За последние два десятилетия различные методы управления квантовыми системами получили значительное развитие, как в части теории, так и в экспериментальной реализации. Актуальность этой области исследований обусловлена большой практической значимостью решаемых задач - от управления химическими реакциями до создания квантового компьютера и сверхбезопасных квантовых каналов связи.

Наверное, одним из наиболее интересных и многообещающих направлений, где необходим высокоточный контроль над квантовым состоянием, является обработка квантовой информации. Из теории квантовых вычислений известно, что для успешного выполнения квантовых алгоритмов необходимо, чтобы ошибка, приходящаяся на каждую элементарную логическую операцию (вентиль), была меньше некоторого порогового значения. Для обеспечения этого условия в эксперименте необходимы эффективные методы управления динамикой квантовой системы. К сожалению, разработка таких методов с помощью аналитических подходов крайне сложна для квантовых систем с большим числом состояний. В связи с этим зачастую прибегают к численным методам, позволяющим найти оптимальное управляющее воздействие на систему для получения нужного квантового состояния или, в общем случае, определенной унитарной эволюции системы.

При численном решении задачи управления ее, как правило, сводят к задаче нахождения максимума некоторого функционала, зависящего от параметров внешних управляющих полей, гамильтониана квантовой системы, а также дополнительных ограничительных параметров на эволюцию системы, если таковые имеются. Простейший пример такого функционала – норма Гильберта-Шмидта

$$\Phi = \frac{1}{N} \left| \text{Tr} \left(U_f^\dagger U(H(t), T) \right) \right|, \quad (1)$$

где N – размерность гильбертова пространства, U_f – требуемый оператор эволюции (например, выполняющий нужную квантовую логическую операцию), $U(H(t), T)$ – оператор эволюции системы в течение времени T с гамильтонианом

$$H(t) = H_0 + \sum_k u_k(t) H_k. \quad (2)$$

Здесь H_0 – «внутренний» гамильтониан, включающий все постоянные взаимодействия в системе, а $u_k(t) H_k$ – взаимодействие с k -тым управляющим полем с зависящей от времени амплитудой $u_k(t)$.

В настоящее время для поиска параметров $u_k(t)$, максимизирующих функционал типа (1), разработано несколько численных подходов, наиболее популярными из которых являются алгоритмы Кротова (см., например, [1]), GRAPE [2] и их различные модификации, например, учитывающие специфику конкретных